

ASPEN Plus 物性方法介绍

卫洪建介绍

物性方法是指模拟计算中所需的物性方法和模型的集合。物性方法的选择是决定模拟结果准确性的关键步骤。ASPEN Plus 提供多种可供选择的物性方法和模型。物性方法与模型的选取不同，模拟结果大相径庭。因此，进行过程模拟必须选择合适的物性方法。

ASPEN Plus 数据库

用户运用 ASPEN Plus 进行模拟计算时，在选定物性模型后，必须确定该模型计算时所需要的相关参数。这些参数可以从数据库中检索，也可以在物性参数 (Properties Parameters) 页面中输入，或使用物性估算 (Property Estimation) 由 ASPEN Plus 估算。

ASPEN Plus 物性数据库有三种类型：系统数据库、内置数据库以及用户数据库。系统数据库是 ASPEN Plus 的一部分，适用于每一个 ASPEN Plus 程序的运行。物性参数会自动由 PUERCOMP、SOLIDS、AQUEOUS、INORGANIC、BINARY 数据库中检索出来。当用户有大量的内置数据时，需要用内置数据库，这些数据库与 ASPEN Plus 的系统数据库无关，系统管理员必须创建并激活内置数据库。当数据不是对所有用户开放或数据具有针对性时，需要使用用户数据库。使用内置数据库或用户数据库时，需要通过 ASPEN Plus 的数据文件管理系统 (DFMS) 来创建数据库。

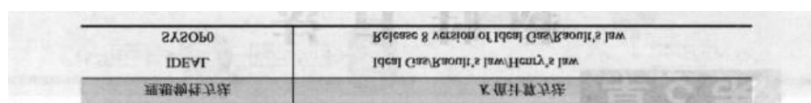
PUERCOMP 是 ASPEN Plus 系统数据库中最基本的数据库，通过帮助功能可以获得该数据库的详细信息。该数据库系统只要包含以下参数：

- ① 常数参数，如热力学温度、绝对压力；
- ② 相变的性质参数，如沸点、三相点；
- ③ 参考态的性质参数，如标准生成焓以及标准生成吉布斯自由能；
- ④ 随温度变化的热力学性质参数，如饱和蒸汽压；
- ⑤ 传递性质的参数，如粘度；
- ⑥ 安全性质的参数，如闪点、着火点；
- ⑦ UNIFAC 模型中的基团参数；
- ⑧ 状态方程中的参数；
- ⑨ 与石油性质相关的参数，如油品的 API 值、辛烷值、芳烃含量、氢含量以及硫含量等。

ASPEN Plus 中的主要物性模型

ASPEN Plus 提供的物性模型分为理想模型、状态方程模型、活度系数模型和特殊模型。

理想模型



22060	well & fluid flow chart to rotate & scale
IDEVT	well & fluid flow chart to rotate & scale

状态方程模型

方法	状态方程
基于 Lee 方程的物性方法	
BWR-L5	DWR Lee-Starling
LK-PLOCK	Lee-Kesler-Plöcker
基于 PR 方程的物性方法	
PENG-ROB	Peng-Robinson
PR-BM	Peng-Robinson with Boston-Mathias alpha function
PRWS	Peng-Robinson with Wong-Sandler mixing rules
PRMHV2	Peng-Robinson with modified Huron-Vidal mixing rules
基于 RK 方程的物性方法	
PSRK	Predictive Redlich-Kwong-Soave
RKSWS	Redlich-Kwong-Soave with Wong-Sandler mixing rules
RKSMHV2	Redlich-Kwong-Soave with modified Huron-Vidal mixing rules
RK-ASPEN	Redlich-Kwong-ASPEN
RK-SOAVE	Redlich-Kwong-Soave
RKS-BM	Redlich-Kwong-Soave with Boston-Mathias alpha function
其他物性方法	
SR-POLAR	Schwartzentruber-Renon

活度系数模型

方法	液相活度系数计算方法	气相活度系数计算方法
基于 Pitzer 的物性方法		
PITZER	Pitzer	Redlich-Kwong-Soave
PITZ-HG	Pitzer	Redlich-Kwong-Soave
B-PITZER	Bromley-Pitzer	Redlich-Kwong-Soave
基于 NRTL 的物性方法		
ELECNRTL	Electrolyte NRTL	Redlich-Kwong
ENRTL-HF	Electrolyte NRTL	HF Hexamerization model
ENRTL-HG	Electrolyte NRTL	Redlich-Kwong
NRTL	NRTL	Ideal gas
NRTL-HOC	NRTL	Hayden-O'Connell
NRTL-NTH	NRTL	Nothnagel
NRTL-RK	NRTL	Redlich-Kwong
NRTL-2	NRTL (using dataset 2)	Ideal gas
基于 UNIFAC 的物性方法		
UNIFAC	UNIFAC	Redlich-Kwong
UNIF-DMD	Dortmund-modified UNIFAC	Redlich-Kwong-Soave

特殊模型

方法	K 值计算方法	适用范围
AMINES	Kent-Eisenberg amines model	MEA、DEA、DIPA、DGA 中 H ₂ S、CO ₂ 的处理
APISOUR	API sour water model	含有 NH ₃ 、H ₂ S、CO ₂ 的废水处理
BK-10	Braun K-10	石油
SOLIDS	Ideal Gas/ Raoult's law/Henry's law /solid activity coefficients	冶金
CHAO-SEA	Chao-Seader corresponding states model	石油
GRAYSON	Grayson-Streed corresponding states model	石油
STEAM-TA	ASME steam table correlations	水或蒸汽
STEAMNBS	NBS/NRC steam table equation of state	水或蒸汽

常见化工体系的物性方法推荐

化工体系	推荐的物性方法
空分	PR, SRK
气体加工	PR, SRK
气体净化	Kent-Eisenberg, ENRTL
石油炼制	BK10, Chao-Seader, Grayson-Streed, PR, SRK
石油化工中 VLE 体系	PR, SRK, PSRK
石油化工中 LLE 体系	NRTL, UNIQUAC
化工过程	NRTL, UNIQUAC, PSRK
电解质体系	ENRTL, Zemaits
低聚物	Polymer NRTL
高聚物	Polymer NRTL, PC-SAFT
环境	UNIFAC + Henry's Law